



TITLE:

# 高分子-低分子間相互作用の振動スペクトルへの影響

AUTHOR(S):

武智, 恭世

---

CITATION:

武智, 恭世. 高分子-低分子間相互作用の振動スペクトルへの影響. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2020, 2019: 86-86

ISSUE DATE:

2020-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/251163>

RIGHT:

高分子-低分子間相互作用の振動スペクトルへの影響

Influence of intermolecular interaction between polymers and low mass compounds on  
vibrational spectra

大阪大学理学研究科高分子科学専攻

武智 恭世

研究成果概要

目的: 本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、水素の二原子分子  $H_2$  が、様々な高分子の近傍に接近したときにどのような配置になる傾向がみられるか、そしてそれが、水素分子の赤外吸収スペクトルにどのように反映されるかについて検討した。

計算: 量子化学計算プログラム(Gaussian 16)を用いて、密度汎関数法を用いた第一原理計算を行った。基底関数は 6-31G (d,p)である。高分子の特定の部分に対応する低分子を選び、その低分子と水素分子の間の相互作用による水素分子の赤外吸収スペクトルの変化を求めた。

結果: 水素分子の基準振動は、水素原子間結合の伸縮振動のみである。孤立した水素分子では、水素分子は対称心を持つために、この振動は赤外不活性と予測され、計算においても一致した結果が得られる。しかし、様々な有機分子近傍における水素分子の安定配置を求めて、その位置における水素分子の構造とその振動について調べると以下のような変化が現れることが明らかになった。(1)水素分子は、有機分子の特定の官能基に、ある一定の配向で安定化する傾向がある。(2)水素分子の伸縮振動は低波数側へのシフトする。(3)水素分子の伸縮振動が赤外活性となる。(4)接近する官能基の違いに依存して、振動数シフトと赤外強度の大きさは変化する。

振動数と赤外強度の変化は、相手分子の種類によって異なり、今回の計算では単純な飽和炭化水素化合物において最も小さく、極性の大きなカルボニル基やアミド基付近に配置された時に大きくなる傾向がある。しかし無極性分子でも芳香環がある場合には、飽和炭化水素よりも、変化量は明らかに増大した。また振動数シフトと赤外吸収強度は相互に関係しており、一般にシフト量が大きくなるにつれて赤外吸収強度が大きくなる傾向が見られた。

水素分子は、いずれの場合においても、一つの水素原子が官能基に対して接近している。このために水素分子の電子分布が非対称になっている。これが水素分子の振動が赤外活性となる原因であると考えられる。

発表論文(謝辞あり)

なし

発表論文(謝辞なし)

なし